

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

Máster en Nanofísica y Materiales Avanzados



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

**Transporte de Información Cuántica en Aislantes
Topológicos**

Alberto Viejo Loredo

Charles Creffield

Gloria Platero Coello

Curso académico 2024-2025

CALIFICACIÓN OBTENIDA : SOBRESALIENTE

Transporte de Información Cuántica en Aislantes Topológicos

Alberto Viejo Loreda
(Dated: May 29, 2025)

En este trabajo se estudiará el modelo SSH, con y sin interacción, y sus particularidades y propiedades en el marco de los aislantes topológicos. En primer lugar se motivará el estudio de este tipo de materiales para, a continuación, abordar la tarea antes descrita. Inicialmente se presentará el modelo SSH sin interacción y, más tarde, se añadirá un término de Hubbard al sistema. Indicar que, durante todo el desarrollo de las secciones, se estará considerando un sistema de dos electrones con espines diferentes.

I. MOTIVACIÓN DEL ESTUDIO

A lo largo de la historia de la física ha habido lo que se conocen como “hot topics”, es decir, temas de interés en momentos concretos del tiempo. En el siglo pasado los avances más importantes fueron el desarrollo de la Mecánica Cuántica y la teoría de la relatividad. Hoy en día uno de estos “hot topics” es el estudio y caracterización de los aislantes topológicos. El interés por este tipo de materiales se disparó en 2016 tras ganar David James Thouless, Duncan Haldane y John Michael Kosterlitz el premio Nobel de física por sus estudios sobre la materia “exótica”. Su estudio se centro en propiedades topológicas de los materiales.

Un aislante topológico es un tipo de material el cual se comporta como aislante en su volumen pero presenta conducción en la superficie. Además, estos materiales presentan estados protegidos por la topología.

En el desarrollo de este documento nos centraremos en uno de los aislantes topológicos más sencillos y el cual viene descrito en primer lugar en [1]. Comenzaremos estudiando el modelo sin interacción para posteriormente añadir un término de Hubbard.

II. EL MODELO SU–SCHRIEFFER–HEEGER (SSH)

El modelo Su–Schrieffer–Heeger o modelo SSH se usa para describir a una cadena de dímeros donde el acoplo entre los átomos es a primeros vecinos. Dicha cadena está formada por N celdas unidad donde cada una contiene 2 átomos, uno en la posición A de la subred y el otro en la posición B. Una representación gráfica del modelo puede verse en la figura 1.

Un sistema físico real para el que se puede aplicar este modelo es el poliacetileno. No obstante, a la hora de describir este sistema debemos tomar dos copias del modelo ya que tenemos espines “up” y espines “down”.

Para iniciarnos en el estudio del sistema empezaremos

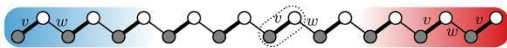


FIG. 1: Representación del modelo SSH

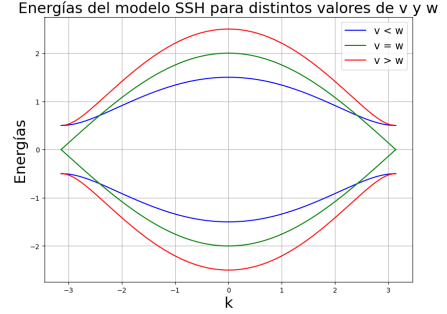


FIG. 2: Representación de las autoenergías del modelo SSH sin interacción para las 3 relaciones posibles entre hoppings: $v = 0.5, 1$ y 1.5 y $w = 1$ siempre.

por el caso más sencillo: el modelo SSH sin interacción. Como nota destacar que en todos los casos que se estudian en este trabajo consideraremos que tenemos dos electrones con espines diferentes, es decir, uno con espín “up” y otro con espín “down”. Además, nos quedamos con el subespacio simétrico para considerar únicamente los términos singlete.

Consideramos que no tenemos ningún término de interacción y que el acoplo entre átomos vienen dados por v y w según sean dentro de una misma celda unidad o entre ellas. El Hamiltoniano del sistema es:

$$H = -v \sum_{n=1}^N |n, B\rangle \langle n, A| - w \sum_{n=1}^N |n+1, A\rangle \langle n, B| + h.c. \quad (1)$$

Lo primero que haremos será resolver el sistema para el volumen. Para ello tomamos condiciones de contorno periódicas y pasamos el espacio de momentos (donde asumimos $a=1$). De este modo obtenemos lo siguiente:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{ik} \\ v + we^{-ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

De donde se obtienen los autovalores de energía:

$$E^{\pm} = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos(k)}. \quad (3)$$

La figura 2 muestra la representación de estas energías en la primera zona de Brillouin.

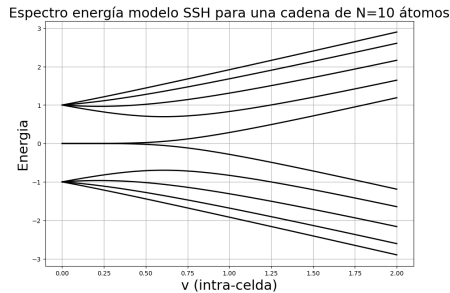


FIG. 3: Representación de las autoenergías del modelo SSH en función del valor de v para una cadena de 10 átomos.

Hasta ahora hemos considerado el sistema con condiciones de contorno periódicas para, de este modo, centrarnos en el volumen de la cadena. No obstante, el sistema tiene también bordes en los extremos y, para la topología, éstos son los más interesantes. Consideremos ahora la cadena finita con condiciones de contorno abiertas; fijemos un valor de w y veamos que ocurre con las autoenergías cuando variamos el valor del otro hopping, es decir, de v . Gráficamente puede verse en la figura 3.

Podemos observar que, a medida que aumenta v , el estado de borde que se encuentra con energía 0 se va desdoblado en dos estados. Antes hemos visto que el sistema presenta un carácter aislante siempre que $v \neq w$. Sin embargo, solo en el caso en el que $v < w$ tenemos estados de borde. Vamos a pararnos un momento para desarrollar esto.

Los estados de borde están topológicamente protegidos, en el caso del modelo SSH dicha protección viene dada por la simetría quirral. La simetría nos dice lo siguiente:

$$H = -\Gamma H \Gamma^{-1}, \quad (4)$$

siendo Γ el operador quirral. Lo que nos dice esta simetría es que, por cada estado con energía E , existirá un estado con energía $-E$. De este modo los estados son simétricos respecto al 0. Sin embargo, los estados con energía 0 no tienen pareja y no pueden desaparecer a menos que se rompa la simetría o el gap. De hecho, en la figura 3 vemos como estos estados se desdoblan al producirse la transición de fase topológica.

Lo que verdaderamente caracteriza la topología son los invariantes topológicos; en este caso el invariante que nos interesa se conoce como **winding number** (ν). Para estudiarlo podemos escribir el Hamiltoniano del sistema usando las matrices de Pauli:

$$H = \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma}. \quad (5)$$

En nuestro caso $\vec{d}(k) = (v + w \cos(k), w \sin(k))$. Vemos que representa una curva cerrada en el plano (x, y) a medida que k varía. Para $v < w$ la circunferencia rodeará al origen y el winding number será 1 y, para $v > w$ la curva

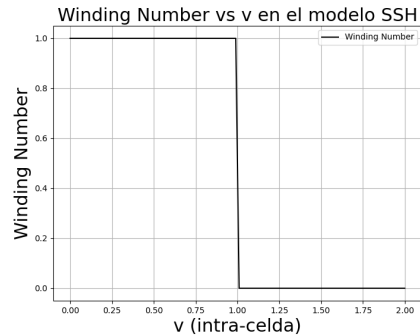


FIG. 4: Representación de la variación del número de winding a medida que varía v para $w = 1$.

no rodeará al origen y el valor del winding number será 0. En el caso $v = w$ se produce la transición topológica y el winding number es indeterminado.

El caso $v < w$ se conoce como **fase topológica** y en ella hay estados de borde. Por su parte, el caso $v > w$ se conoce como fase trivial y en ella no aparecen estados de borde.

De forma más rigurosa puede expresarse el winding number como la siguiente integral:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{\pi}^{\pi} dk \frac{d\phi(k)}{dk}, \quad (6)$$

donde $\phi(k) = \arg(v + we^{-ik})$. Es decir, mide como varía la fase de $h(k)$ a medida que k recorre la primera zona de Brillouin. Si da una o más vueltas completas $\nu = 1$ y, si no $\nu = 0$. Ésto está íntimamente relacionado con la fase de Berry; sin embargo, no entraremos en ello en este documento.

Una representación gráfica de como varía el winding number puede verse en la figura 4.

III. EL MODELO SSH-HUBBARD (SSH)H

Pasemos ahora a subir un escalón en la dificultad del sistema. Para ello añadimos un término extra que represente una interacción tipo Hubbard. Destacar que estamos considerando únicamente los términos singlete del sistema. Antes de analizar los resultados es necesario pararse a definir lo que se conoce como **doublones**.

Dado que tenemos 2 electrones en el sistema y N átomos tenemos varias posibilidades para la ocupación de dichos átomos; en concreto tenemos 3: totalmente lleno (ambos electrones en él), parcialmente lleno (1 electrón) o vacío (sin electrones en él). Un **doublón** son dos partículas formando un singlete que se repelen fuertemente con interacción Coulomb y se propagan unidas en la red porque no tienen medio de disipar su energía para propagarse por separado.

El Hamiltoniano del modelo SSH-Hubbard (SSH)H es

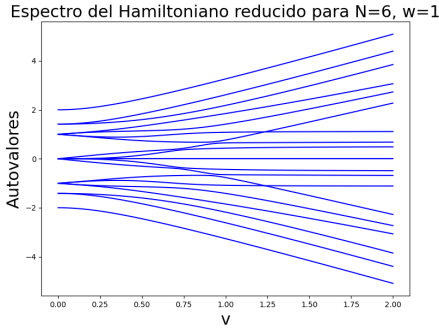


FIG. 5: Autoenergías del modelo SSHH en función del valor de v .

el siguiente:

$$H = - \sum_{j,\sigma} (v c_{j,A,\sigma}^\dagger c_{j,B,\sigma} + w c_{j,B,\sigma}^\dagger c_{j+1,A,\sigma} + h.c.) + U \sum_{j,\alpha=A,B} n_{j,\alpha,\uparrow} n_{j,\alpha,\downarrow}, \quad (7)$$

donde c y c^\dagger son los operadores de destrucción y creación usuales y n es el operador número el cual puede expresarse en función de los operadores de creación y destrucción como:

$$n_{j,\sigma} = c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}. \quad (8)$$

Una vez se han descrito las nociones básicas del modelo pasemos a estudiar casos particulares.

A. Modelo SSHH sin interacción ($U=0$)

Para comenzar con la sección trataremos el caso más sencillo (pero no por ello menos interesante), es decir, el caso en el que el término de interacción U es 0. Notar que la dimensión de nuestra matriz ahora es $N(N+1)/2$, es decir, ha aumentado y tendremos, por ejemplo, 21 estados para $N = 6$. Si bien el modelo SSH se puede tratar a mano el modelo SSSH es prácticamente imposible de tratar sin recurrir a simulaciones numéricas. Calculando el Hamiltoniano, diagonalizándolo y representando las autoenergías en función del hopping v obtenemos un resultado como el de la figura 5.

Cabe destacar que, hasta ahora, hemos situado la fase topológica en aquellos valores donde se cumple $v < w$. Sin embargo, si uno mira el diagrama de energías, puede observar que el gap empieza a abrirse antes de llegar al punto donde ambos hoppings se igualan. Esto es debido a la finitud de la cadena, es decir, a medida que aumentamos N el gap se empieza a abrir más tarde. Con un $N = 100$ dicha apertura se observa en $v = w$.

A continuación trataremos de analizar que ocurre con la dinámica de los electrones, es decir, como evoluciona el sistema una vez hemos fijado la posición inicial de

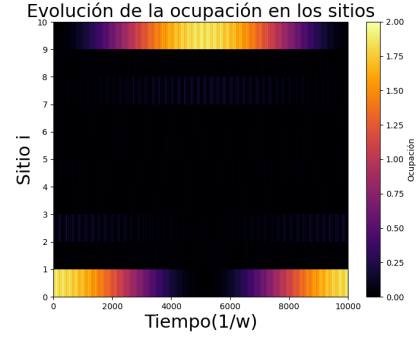


FIG. 6: Representación de la evolución de la ocupación de los diferentes átomos del sistema durante la evolución temporal.

nuestras dos partículas. Para ello lo que hacemos es la siguiente evolución temporal. Sabemos que en mecánica cuántica la evolución temporal de un estado se describe del siguiente modo:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle. \quad (9)$$

Escribimos el estado inicial como:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle, \quad (10)$$

donde:

$$c_n = \langle \phi_n | \psi(0) \rangle. \quad (11)$$

La evolución temporal se escribe ahora como:

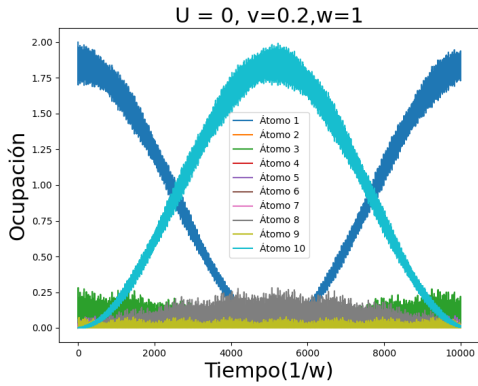
$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t} |\phi_n\rangle, \quad (12)$$

donde E_n son las autoenergías del Hamiltoniano H .

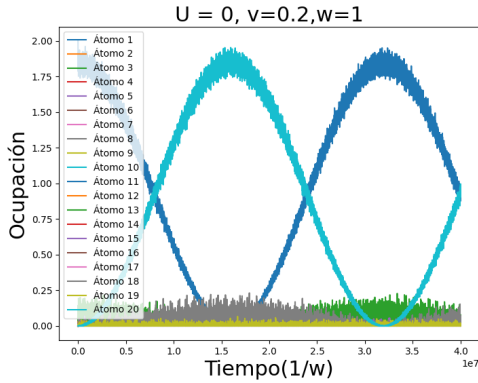
Supongamos que colocamos ambos electrones en el primer átomo de nuestra cadena y dejamos evolucionar un tiempo suficientemente largo. El resultado que obtenemos se muestra en la figura 6. Las unidades de tiempo son $1/w$ ya que estamos tomando $\hbar = 1$ y fijamos $w = 1$. Esto hace que el valor de v venga en función del de w y que el tiempo se mida en unidades del inverso de w .

La figura 6 nos da unos resultados muy poco esperables de forma intuitiva. Lo que vemos es que los electrones pasan del primer átomo al último sin atravesar el “bulk” del sistema. En un sistema con condiciones de contorno periódicas esto podría verse como algo lógico pero al estar trabajando con condiciones abiertas el resultado parece extraño a primera vista ya que es como si las partículas “se teletransportasen”. Vamos a tratar de explicar el por qué de este fenómeno.

Cuando nuestro sistema se encuentra en la fase topológica, $v < w$, los estados de borde de la cadena están exponencialmente localizados y tienen muy poca amplitud en el volumen de la misma. Al ser nuestra cadena finita los extremos presentan una superposición que,



(a) Oscilaciones entre extremos para una cadena de 10 átomos.



(b) Oscilaciones entre extremos para una cadena de 20 átomos.

FIG. 7: Representación de la evolución de la ocupación de los diferentes átomos del sistema durante la evolución temporal para distintos tamaños de la cadena.

si bien es pequeña, es no nula. De este modo se permite un túnel cuántico entre ellos; de ahí el comportamiento oscilatorio entre extremos que observamos. Dichas oscilaciones son similares a las Oscilaciones de Rabi o las oscilaciones de sabor de los neutrinos.

Destacar que, cuanto más larga es la cadena, más pequeña es la superposición entre extremos y más tiempo se necesita dejar la evolución temporal para observar las oscilaciones. Esto puede observarse en la figura 7. Para la cadena de 10 átomos observamos oscilaciones en un tiempo del orden de 10^4 mientras que, cuando doblamos el tamaño de la cadena y tenemos 20 átomos el tiempo necesario para la observación del comportamiento oscilatorio pasa a ser del orden de 10^7 . Si fuéramos capaces de conseguir una cadena de tamaño infinito la superposición sería 0 y las oscilaciones no se producirían.

Anteriormente hemos hablado sobre la localización de los estados, pero, ¿cómo podemos medirla?. Una solución a este problema se obtiene mediante el cálculo de lo que se conoce como **Inverse Participation Ratio (IPR)**, éste nos mide cómo de localizado se encuentra un estado,

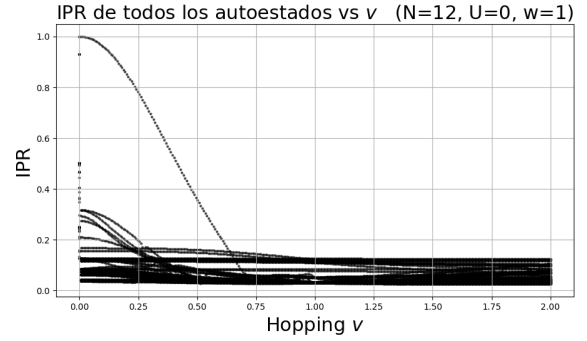


FIG. 8: Valor del IPR para el modelo SSHH en función del valor de v .

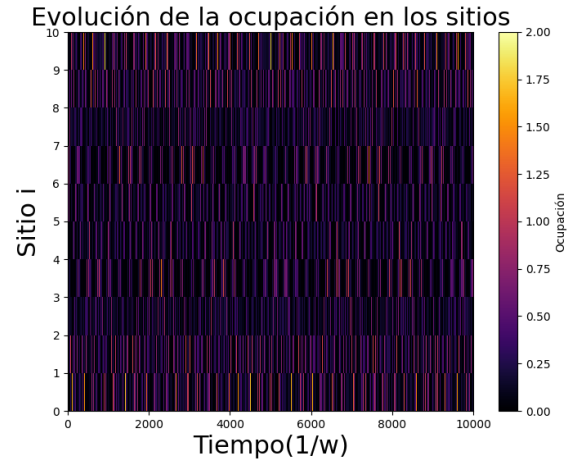


FIG. 9: Evolución de la ocupación en el modelo SSHH en fase trivial.

es decir, cuán concentrada o dispersa está su función de onda. Podemos calcularlo como:

$$IPR = \sum_i |\psi_i|^4. \quad (13)$$

Si el IPR es 1 significa que el estado se encuentra totalmente localizado mientras que, tiende a $\frac{1}{N}$, siendo N la dimensión del Hamiltoniano, cuando la función de onda se expande por todo el sistema, es decir, cuando no hay localización ninguna. En la figura 8 podemos ver como varía el IPR en función del valor del hopping v . Como era de esperar nos encontramos un estado fuertemente localizado para v pequeño el cual va decayendo a medida que v se aproxima a w .

A modo de completitud para esta sección veamos que ocurre si modificamos la fase del sistema, es decir, si pasamos de la fase topológica a la trivial. Para ello lo que hacemos es tomar $v > w$. Los resultados se muestran en la figura 9. Como podemos observar en este caso se pierde el transporte topológico entre extremos y los electrones se mueven a lo largo de toda la cadena.

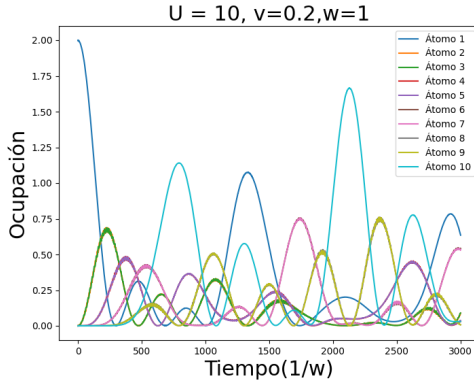


FIG. 10: Evolución de la ocupación en el modelo SSHH en fase topológica para valores de U grandes.

B. Modelo SSHH con interacción ($U \neq 0$)

Hasta ahora hemos estado trabajando con la interacción de tipo Hubbard “apagada”, es decir, con $U = 0$. Sin embargo, en esta sección vamos a ver como ciertos valores de U nos llevan a resultados sorprendentes.

Dentro de este caso nos encontramos con varios regímenes según el valor que asignemos a la interacción U . Los que mas nos van a interesar son dos: interacción baja e interacción alta; es decir, en un principio vamos a centrarnos en esos dos casos.

1. Interacción alta

Cuando asignamos un valor de U lo suficientemente grande lo que nos encontramos es que el transporte topológico se rompe, es decir, a pesar de que nuestras condiciones iniciales de posición de los electrones no han cambiado, la interacción hace ya que no oscilen entre extremos si no que más átomos entren en juego. Esto podemos observarlo de forma muy evidente en la figura 10. Como vemos otros átomos diferentes del primero y el último alcanzan una ocupación reseñable. Si nos vamos a interacciones aún más grandes, por ejemplo $U = 100$, este cambio se ve de forma más evidente. Más adelante, cuando hayamos presentado que ocurre para casos de baja interacción, trataremos de dar una explicación a este fenómeno.

2. Interacción baja

En este caso nos restringimos a valores pequeños de U . Tomaremos $U = 0.1$ y veremos que ocurre. El resultado se muestra en la figura 11. Podemos observar que el transporte topológico se mantiene aunque se observan pequeñas distorsiones debido a la interacción en el diagrama de densidad.

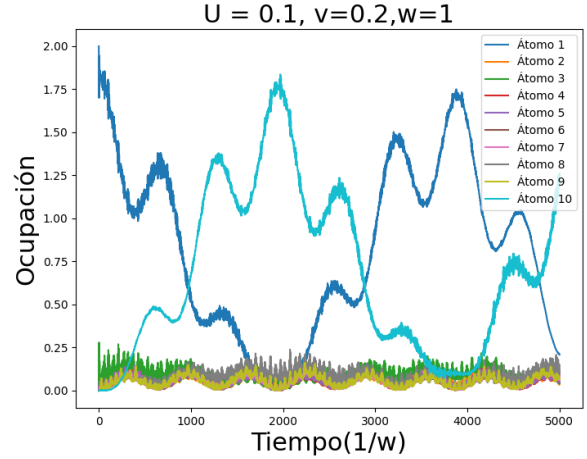


FIG. 11: Evolución de la ocupación en el modelo SSHH en fase topológica para valores bajos de U .

Una vez que se ven estas distorsiones es natural preguntarse si la velocidad de las oscilaciones se modifica al añadir interacción. Para ello lo más sencillo es realizar un mapa de calor con las dos posibilidades: sin interacción y con interacción baja. El resultado se muestra en la figura 12. Podemos observar que, en el caso en el que la interacción es pequeña, el transporte ocurre más rápidamente que en el caso sin interacción.

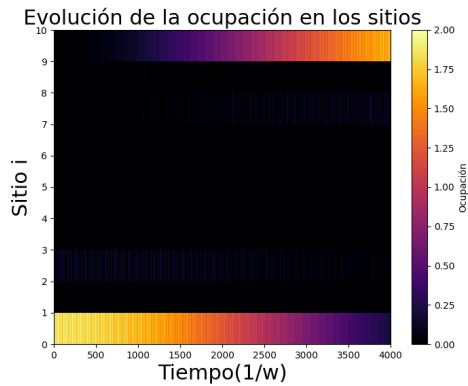
3. Comparación entre ambos y discusión de los resultados

La diferencia más notable que observamos entre los dos regímenes es el hecho de que uno mantiene el transporte topológico mientras que el otro lo destruye. El que nos interesa para este estudio es el que lo mantiene, es decir, el límite de interacciones débiles. Hemos encontrado que el transporte topológico se acelera cuando se toma un valor bajo de la interacción. Para tratar de dar una explicación a este sorprendente fenómeno nos basaremos en [2].

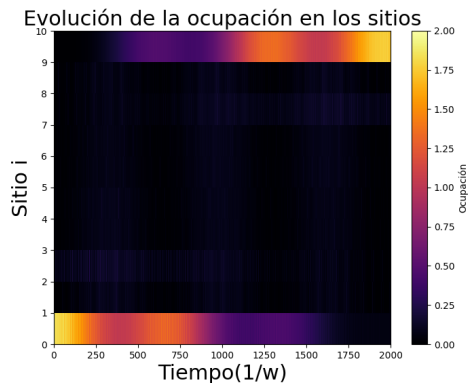
Los aspectos técnicos y matemáticos mas profundos y rigurosos de este paper se escapan totalmente del objetivo y el nivel de este trabajo. No obstante vamos a tratar de dar una idea general del fenómeno de modo que éste pueda ser estudiado en un futuro de manera más rigurosa.

Lo que encontraron los investigadores [2] es que para valores de U pequeños (ellos toman los hoppings como $t \pm t_d$ y toman como condición $U < 2t$ de forma aproximada) el transporte topológico se acelera debido a que se produce un mayor acoplo entre los modos de borde.

Para valores de interacción superiores lo que ocurre es que se abre un gap de Mott en el espectro de las excitaciones haciendo que los electrones necesiten energía extra para avanzar debido al efecto umklapp. Cada vez que ocurre un umklapp los electrones transmiten cierta energía al sistema (la cadena) ralentizando el movimiento.



(a) Oscilaciones entre extremos para una cadena de 10 átomos sin interacción.



(b) Oscilaciones entre extremos para una cadena de 10 átomos con $U = 0.1$.

FIG. 12: Comparación de la evolución temporal de la ocupación de la cadena para distintos valores de la interacción U .

Cuando la interacción es baja el umklapp casi no se produce y por tanto los modos de borde se solapan más debido al refuerzo de la dimerización. Sin embargo, para valores de interacción elevados los choques de umklapp dominan de modo que se cede más energía al cristal, la dimerización cae y los modos de borde se solapan mucho menos destruyendo así el transporte topológico.

IV. CONCLUSIONES Y FUTUROS PASOS

Para finalizar el trabajo vamos a hacer un resumen de lo que hemos expuesto anteriormente. Hemos estudiado el sistema SSH con y sin interacción de modo que hemos visto que hay dos fases diferentes en función del valor de los hoppings: la topológica y la trivial. En nuestro caso la que más nos interesa es la topológica. Hemos visto también que dichas fases vienen caracterizadas por un invariante topológico conocido como el número de winding. Además hemos encontrado que, cuando situamos los electrones en uno de los bordes de la cadena, el transporte que se produce es anómalo ya que no se mueven a través de todo el sistema, si no que saltan de un borde del mismo al otro. También hemos estudiado el papel que juega la interacción en todo esto; hemos visto como, si bien pequeñas interacciones favorecen y aceleran el transporte topológico, valores elevados de la misma lo destruyen.

Este trabajo podría ampliarse de varias maneras: cambiando las condiciones de contorno, como en [3], y estudiando como se modifica nuestro sistema; generalizando el modelo a dimensiones mayores (por ejemplo al estudio de aislantes topológicos en 2D como se hace en [4]) o, estudiando otras cantidades relevantes como, por ejemplo, la entropía de entrelazamiento siguiendo el ejemplo de [5].

-
- [1] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, *A short course on topological insulators*, Vol. 919 (Springer, 2016).
 - [2] M. Sugiura and Y. Suzumura, Correlation effect on peierls transition, *Journal of the Physical Society of Japan* **71**, 697 (2002).
 - [3] L. Lin, Y. Ke, and C. Lee, Topological invariants for interacting systems: From twisted boundary conditions to center-of-mass momentum, *Physical Review B* **107**, 125161 (2023).
 - [4] J. Zurita, C. E. Creffield, and G. Platero, Topology and interactions in the photonic creutz and creutz-hubbard ladders, *Advanced Quantum Technologies* **3**, 1900105 (2020).
 - [5] D. Wang, S. Xu, Y. Wang, and C. Wu, Detecting edge degeneracy in interacting topological insulators through entanglement entropy, *Physical Review B* **91**, 115118 (2015).
 - [6] L. Barbiero, L. Santos, and N. Goldman, Quenched dynamics and spin-charge separation in an interacting topological lattice, *Physical Review B* **97**, 201115 (2018).
 - [7] E. Di Salvo, A. Moustaj, C. Xu, L. Fritz, A. Mitchell, C. M. Smith, and D. Schuricht, Topological phases of the interacting ssh model: an analytical study, arXiv preprint arXiv:2408.01421 (2024).
 - [8] J. Zhang, C.-P. Lv, and Y.-C. Li, Detect topological quantum phases in a one-dimensional interactional fermion system, *Physics Letters A* **420**, 127746 (2021).
 - [9] X. Zhou, S. Jia, and J.-S. Pan, Interaction-induced phase transitions at topological quantum criticality of an extended su-schrieffer-heeger model, *Physical Review B* **111**, 195117 (2025).
 - [10] H. Guo and S.-Q. Shen, Topological phase in a one-dimensional interacting fermion system, *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* **84**, 195107 (2011).
 - [11] S. R. Manmana, A. M. Essin, R. M. Noack, and V. Gurarie, Topological invariants and interacting one-dimensional fermionic systems, *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* **86**, 205119 (2012).